

СРАВНЕНИЕ КРИТЕРИЕВ КАЧЕСТВА АППРОКСИМАЦИИ ДАННЫХ НА ОСНОВЕ ЭВОЛЮЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Одной из распространенных задач физики конденсированного состояния, решаемых средствами численного моделирования, является аппроксимация экспериментальных данных. В частности, при описании процессов люминесценции в диэлектриках используются математические модели, представляющие собой системы кинетических уравнений. Такие системы, как правило, решаются численными методами, так как аналитическое решение не может быть найдено. При аппроксимации экспериментальных данных в рамках предложенной модели искомые решения в виде наборов значений модельных параметров определяются на основе минимизации количественных различий между расчетными и экспериментальными данными. Минимизируемая функция при этом является многомодальной, нелинейной, пространство поиска зачастую обладает большой размерностью. Кроме того, вследствие расчета параметров модели численными методами, производная такой функции может быть вычислена только приближенно. Все вышеперечисленное является серьезным препятствием для традиционных методов решения оптимизационных задач. Альтернативой являются эвристические методы, один из которых – генетический алгоритм (ГА).

ГА – это итеративная процедура, которая работает с популяцией особей, развивая ее с помощью моделирования механизмов естественного отбора и генетики; особи или индивидуумы являются потенциальными решениями для решаемой задачи.

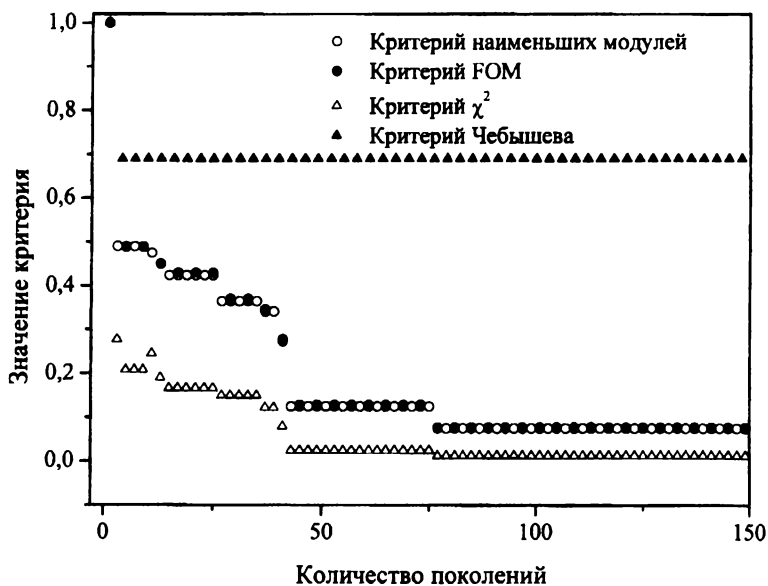
Каждой особи соответствует целевая функция, которая служит для оценки приспособленности индивидуума. В качестве приспособленности особи в данной задаче выступает качество аппроксимации. Вопрос выбора целевой функции для генетических алгоритмов имеет большое значение, так как от используемой функции зависит эффективность работы алгоритма. В первую очередь необходимо обеспечить универсальность классификации, а также корректную и эффективную градацию всех особей по приспособленности.

В настоящей работе были рассмотрены четыре критерия, обычно используемые для оценки качества аппроксимации экспериментальных данных: наименьших модулей, χ^2 – критерий (хи-квадрат), FOM (figure of merit), критерий Чебышева.

Для сравнения проведен анализ поведения всех критериев в процессе оптимизации с помощью ГА. График, показывающий изменения критериев, приведен на рисунке. Значения каждого параметра нормировались на соответствующее значение, рассчитанное для первого поколения. Из рисунка видно, что критерий Чебышева на большей части интервала является константой, что не позволяет эффективно выделять более пригодные решения. Критерий χ -квадрат ведет себя нестабильно и не является монотонно убывающей функцией, особенно на начальных этапах моделирования. Такой

критерий также представляется менее эффективным, поскольку чаще будет отдаваться предпочтение какой-либо особи в случае, если их приспособленности сложно сравнить вследствие приблизительного равенства. В случаях суммы модулей разности и критерия FOM наблюдается монотонность без различных выбросов. Отметим также, что показатель качества описания экспериментальных данных должен быть универсальным, то есть позволять сравнивать разные варианты аппроксимации между собой на основе малых количественных различий. С этой точки зрения более целесообразным представляется, на наш взгляд, выбор критерия FOM. В нем учитывается относительная величина отклонений, а не абсолютная, как в случае с критерием наименьших модулей.

На основании проведенного анализа в качестве критерия оценки качества аппроксимации экспериментальных данных при эволюционном моделировании показаны преимущества показателя FOM. Этот критерий может быть положен в основу целевой функции, используемой генетическим алгоритмом.



Зависимость величины критерия от числа поколений